

Réseaux de Pétri stochastiques comportant une seule place

1ere partie: régime stationnaire

K. Batmanov ^{*1}, M. Petitot ^{†1} and C. Versari ^{‡1}

¹L.I.F.L, université Lille I

26 mars 2013

Résumé

Le formalisme des systèmes de réactions chimiques (de manière équivalente des réseaux de Pétri stochastiques) est très souvent utilisé en biologie, en sûreté de fonctionnement etc. La série génératrice associée à la *master-equation* est solution d'une équation d'évolution du type *équation de Schrödinger*.

On adopte ici l'approche classique par le calcul des fonctions propres en se concentrant, dans cette première partie, sur le calcul de la distribution stationnaire pour un système comportant une seule espèce chimique. On montre que, génériquement, la série génératrice stationnaire est une fonction holomorphe dans tout le plan complexe. Des exemples de calcul (symbolique-numérique) sur ordinateur sont développés.

Keywords : Stochastic Petri nets, Stochastic models in biology, Weyl algebra, Generating series, Computer algebra.

Table des matières

1	Introduction	2
2	Formulaire raisonné	3
3	Résultats généraux	5
3.1	Définitions	5
3.2	Structure de l'hamiltonien	6
3.3	Solutions entières	8
4	Les systèmes chimiques d'ordre 1	8
4.1	Distribution stationnaire	9
4.2	Résolution directe de l'équation de Schrödinger	9

*kirill.batmanov@lifl.fr

†michel.petitot@lifl.fr

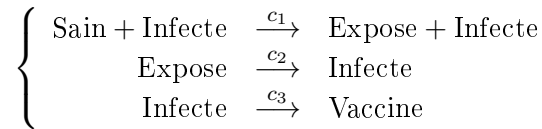
‡cristian.versari@lifl.fr

5 Les systèmes chimiques d'ordre 2	9
5.1 Modèles de base	9
5.2 Calcul de la série génératrice des probabilités	11
6 Applications numériques	13
6.1 Hamiltonien du 2eme ordre	13
6.2 Hamiltonien du 4eme ordre	15
A Rappels sur l'équation de Kummer	17
A.1 Généralités	17
A.2 Solutions entières	17
A.3 Equation hypergéométrique biconfluente	18
A.4 L'équation du 2eme ordre à coefficients polynomiaux de degré 1	19

1 Introduction

Dans la modélisation stochastique des systèmes biologiques, le formalisme des systèmes de réactions chimiques (de manière équivalente des réseaux de Pétri stochastiques) est très utilisé. On dispose de plusieurs milliers de modèles de ce type écrits dans le langage SBML, langage spécialement conçu à cet usage.

Par exemple, la propagation d'une épidémie se modélise par le système de réactions chimiques du genre



La variable *aléatoire* d'état $X(t) := (X_1(t), X_2(t), \dots, X_d(t))$, pour cet exemple $d = 4$, compte le nombre d'individus sains, infectés, ... à l'instant t . L'état du système à l'instant t est donc un multi-indice $n \in \mathbb{N}^d$ formé d'entiers naturels.

En adoptant la loi de t'Hooft fixant la probabilité qu'une réaction se déclenche pendant un intervalle de temps $[t, t + \varepsilon[$ de durée infiniment petite, le processus $\{X(t); t \geq 0\}$ est une chaîne de Markov en temps continu $t \in \mathbb{R}$, définie sur l'espace d'état discret \mathbb{N}^d . La distribution $\pi_n(t) := \text{prob}\{X(t) = n\}$ est particulièrement importante pour le suivi d'une épidémie.

Question brute : A partir de la donnée d'un système de réactions chimiques, réaliser un logiciel capable de

- calculer la distribution transitoire $\pi_n(t) := \text{prob}\{X(t) = n\}$,
- calculer les différents moments de la variables aléatoires $X(t)$, en particulier la matrice de covariance $\text{Cov}(X_i(t), X_j(t))$ pour $1 \leq i \leq j \leq d$,
- identifier les constantes cinétiques (c_1, c_2, \dots) , des réels *positifs* à partir de données expérimentales.

Dans l'état actuel de l'art, ce genre de logiciel repose essentiellement sur des simulations Monte-Carlo [3]. On se propose d'obtenir des algorithmes beaucoup moins coûteux en temps de calcul mêlant calcul symbolique et calcul numérique. Le calcul symbolique permet d'obtenir

des formules afin de générer (automatiquement) des codes numériques spécialement optimisés pour le modèle étudié.

Dans cette première partie, nous nous concentrons sur le calcul de la distribution stationnaire π^* pour un système de réactions chimiques comportant une *seule* espèce chimique, i.e. lorsque $d = 1$. La série génératrice associée $\phi^*(z) := \sum_{n \geq 0} \pi_n^* z^n$ est solution d'une équation différentielle *linéaire* dont les coefficients sont des polynômes en z dépendant des constantes cinétiques.

Nous montrons que les singularités à distance finie de cette équation différentielle sont *en général* dans le disque unité $|z| < 1$. La série $\phi^*(z)$, lorsqu'elle existe, est convergente en $z = 1$ car $\phi^*(1) = 1$. Elle est donc analytique sur toutes les singularités à distance finie de l'équation ; c'est donc une fonction holomorphe dans tout le plan complexe \mathbb{C} .

Les solutions de l'équation différentielle, notées $f(z) := \sum_n a_n z^n$, dont leur rayon de convergence r est fini, doivent être écartées. La croissance asymptotique des coefficients a_n est alors de la forme

$$|a_n| \sim M r^{-n}, \quad (n \rightarrow \infty),$$

avec en général $r < 1$. Par contre, la solution cherchée $\phi^*(z)$ a un rayon de convergence infini ; c'est donc une solution *minimale* au sens de Pincherle [2] :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{\pi_n^*}{a_n} \right| = 0.$$

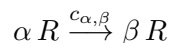
De ce résultat théorique (à notre connaissance nouveau), on en déduit un algorithme pour calculer la distribution stationnaire π^* . Cet algorithme est facilement implémentable si l'on dispose d'un système de calcul symbolique tel que MAPLE. Cependant il reste beaucoup de travail pour traiter de manière garantie les cas *raides* et contrôler les erreurs de troncature dans les séries.

La même méthode s'applique pour le calcul des moments factoriels $\mu_k := E(X^k)$, $k \in \mathbb{N}$, en régime stationnaire. L'algorithme repose sur l'identité

$$\phi^*(z) = \sum_{n \geq 0} \pi_n^* z^n = \sum_{k \geq 0} \mu_k \frac{(z-1)^k}{k!}.$$

2 Formulaire raisonné

Soit un entier naturel N et une espèce chimique R . On considère le *réseau de Pétri stochastique* défini par l'ensemble des réactions chimiques de la forme [4]



où les deux entiers α, β balayent l'ensemble $\{0, 1, \dots, N\}$ et où les *constantes cinétiques* $c_{\alpha,\beta}$ sont des réels arbitraires positifs ou nuls. Lorsqu'une réaction chimique se produit, elle consomme α molécules R et produit β molécules R . Les réactions telles que $\alpha = \beta$ sont sans effet sur le nombre de molécules. Etant *inobservables*, elles sont retirées du modèle. Le système de réactions chimiques est alors caractérisé par la donnée de $(N^2 + N)$ constantes

cinétiques arbitraires $c_{\alpha,\beta}$ (positives ou nulles) que l'on peut ranger dans une matrice carrée $C := (c_{\alpha,\beta})$ pour $0 \leq \alpha, \beta \leq N$ et $\alpha \neq \beta$. Par exemple pour $N = 2$, on obtient la matrice

$$C = \begin{pmatrix} * & c_{0,1} & c_{0,2} \\ c_{1,0} & * & c_{1,2} \\ c_{2,0} & c_{2,1} & * \end{pmatrix} \quad (1)$$

Lorsqu'il y a n molécules présentes dans le système à l'instant t , la probabilité qu'une réaction chimique se déclenche pendant l'intervalle de temps $[t, t + \varepsilon[$ est supposée de la forme $w(n)\varepsilon + o(\varepsilon)$ où ε est un infiniment petit et $w(n)$ une fonction de l'entier n , appelée *propensity function* en anglais. La loi de Gerard t'Hooft précise que le réel positif $w(n)$ est proportionnel au nombre de façons de choisir un ensemble de α molécules prises aléatoirement parmi les n molécules présentes, ce qui donne

$$w(n) = c_{\alpha,\beta} \binom{n}{\alpha} = \frac{1}{\alpha!} c_{\alpha,\beta} n^\alpha, \quad (2)$$

où $n^\alpha := n(n-1)(n-2)\dots(n-\alpha+1)$ est une puissance *tombante*. Dans la suite, pour simplifier légèrement les formules, le facteur $\frac{1}{\alpha!}$ est incorporé dans la constante cinétique $c_{\alpha,\beta}$.

Soient R et S les deux opérateurs de *décalage*¹ à droite et à gauche obtenus en posant

$$\begin{aligned} R\bullet(\pi_0, \pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots) &:= (0, \pi_0, \pi_1, \pi_2, \dots) \\ S\bullet(\pi_0, \pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots) &:= (\pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_4, \dots) \end{aligned}$$

et l'opérateur n défini par

$$n\bullet(\pi_0, \pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots) := (0, \pi_1, 2\pi_2, 3\pi_3, \dots).$$

pour toute suite π_n indicée par des entiers naturels. Remarquons que l'action de l'opérateur S fait perdre la valeur du terme π_0 .

Soit $X(t)$ la variable aléatoire qui compte le nombre de molécules présentes dans le système à l'instant t . On lui associe la distribution $\pi_n(t) := \text{prob}\{X(t) = n\}$, ($n \in \mathbb{N}$). On montre que l'évolution dans le temps de la distribution $\pi(t)$, i.e. du vecteur *stochastique* de la chaîne de Markov (en temps continu) $\{X(t); t \geq 0\}$, est gouvernée par l'équation différentielle *linéaire* en dimension infinie

$$\frac{d}{dt}\pi(t) = W\bullet\pi(t) \quad (3)$$

associée à l'opérateur aux différences

$$W := \sum_{\alpha,\beta=0}^N c_{\alpha,\beta} (S^\alpha R^\beta - 1) n^\alpha. \quad (4)$$

Le terme sous le signe somme dépend de l'opérateur n^α , une puissance tombante de l'opérateur n . Il est égal à $(S^\alpha R^\beta - 1)w(n)$ où w est la *propensity function* définie en (2). Les opérateurs $S^\alpha R^\beta - 1$ et $w(n)$ ne commutent pas.

1. Stricto-sensu, les deux opérateurs de *décalage* à droite et à gauche ne commutent pas et donc ne sont pas *inverses* l'un de l'autre. On a $SR = \text{Id}$ mais $RS \neq \text{Id}$. En fait, ces deux opérateurs sont *adjoints* l'un avec l'autre pour le produit scalaire $(f | g) := \sum_{n \geq 0} f_n g_n$, autrement dit $(S\bullet f | g) = (f | R\bullet g)$. Pour des vecteurs π_n indicés par un entier *relatif* $n \in \mathbb{Z}$, les opérateurs R et S vérifient $RS = SR = \text{Id}$.

Dans ce contexte très particulier de la formule (4), du à la présence de l'opérateur \mathbf{n}^α , les opérateurs S et R commutent : en effet les premiers termes la suite réelle $\mathbf{n}^\alpha \bullet \pi := (n^\alpha \pi_n ; n \geq 0)$ sont nuls pour $n = 0, \dots, \alpha - 1$. Par suite, $S^\alpha R^\alpha \mathbf{n}^\alpha = \mathbf{n}^\alpha$. On a donc

$$(S^\alpha R^\beta - 1) \mathbf{n}^\alpha = \begin{cases} (S^{\alpha-\beta} - 1) \mathbf{n}^\alpha & \text{si } \alpha \geq \beta \\ (R^{\beta-\alpha} - 1) \mathbf{n}^\alpha & \text{sinon} \end{cases}$$

En général, les opérateurs S et R ne commutent pas mais l'un est l'adjoint de l'autre, i.e. $(S \bullet f \mid g) = (f \mid R \bullet g)$ pour toutes suites réelles f et g indicées par des entiers naturels.

Cette équation différentielle linéaire (dite *master-equation* en anglais) s'intègre, en théorie, sous la forme

$$\pi(t) = \exp \left((t - t_0) W \right) \bullet \pi(t_0)$$

On associe à la distribution $\pi(t)$ la série génératrice (ordinaire) des probabilités

$$\phi(z, t) := \sum_{n \geq 0} \pi_n(t) z^n.$$

En utilisant le dictionnaire classique entre opérateurs²

$$\begin{aligned} R &\longleftrightarrow z \\ S &\longleftrightarrow z^T \\ \mathbf{n} &\longleftrightarrow \theta \quad (:= z \frac{\partial}{\partial z}) \\ S \mathbf{n} &\longleftrightarrow \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \tag{5}$$

la master-equation (3) se réécrit alors comme une équation d'évolution, du type Schrödinger

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(z, t) = H \bullet \phi(z, t) \tag{6}$$

associée à l'opérateur différentiel (un analogue de l'hamiltonien en physique quantique)

$$H := \sum_{\alpha, \beta=0}^N c_{\alpha, \beta} (z^{\beta-\alpha} - 1) \theta^\alpha = \sum_{\alpha, \beta=0}^N c_{\alpha, \beta} (z^\beta - z^\alpha) \frac{\partial^\alpha}{\partial z^\alpha} \tag{7}$$

L'équation de Schrödinger (6) s'intègre, en théorie, sous la forme

$$\phi(z, t) = \exp \left((t - t_0) H \right) \bullet \phi(z, t_0)$$

Dans la pratique, on supposera souvent que le nombre de molécules initial est un nombre entier connu, noté n_0 , donc la distribution initiale $\pi(t_0)$ est la distribution de Dirac δ_{n_0} , autrement dit, la série génératrice initiale est $\phi(z, t_0) := z^{n_0}$.

3 Résultats généraux

3.1 Définitions

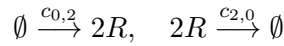
Définition 1 (généricité) *Soit un entier $N \in \mathbb{N}$. Un système de réactions chimiques d'ordre N sera dit générique lorsque les constantes cinétiques $c_{\alpha, \beta}$, $\alpha, \beta = 1 \dots N$ ne sont reliées par aucune relation polynomiale à coefficients dans \mathbb{Q} .*

2. Le formalisme n'est pas exactement celui des algèbres de Ore. On pose $z^T \bullet z^\alpha := z^{\alpha-1}$ si $\alpha > 0$ et 0 sinon. Les opérateurs $1/z$ et z^T agissent de manière différente sur le mot vide $1 := z^0$.

Définition 2 (distribution stationnaire) Une distribution π_n , $n \in \mathbb{N}$ (une suite de nombres réels appartenant à l'intervalle $[0, 1]$ de somme égale à 1) est dite stationnaire lorsqu'elle vérifie l'équation récurrente $W \bullet \pi = 0$.

3.1.1 Cas particuliers

1. Lorsque la matrice C définie en (1) est triangulaire *inférieure*, chacune des réactions chimiques fait strictement *diminuer* le nombre de molécules présentes dans le système. Il en découle que la variable d'état $X(t)$ décroît au cours du temps. La série génératrice (en régime transitoire) $\phi(z, t)$ est polynomiale à tout instant t . Intuitivement pour tout entier k , les fonctions propres $f_k(z)$ sont des polynômes en z .
2. Lorsque la matrice C définie en (1) est triangulaire *supérieure*, chacune des réactions chimiques fait strictement *augmenter* le nombre de molécules présentes dans le système. Il en découle que la variable d'état $X(t)$ augmente indéfiniment au cours du temps comme pour le processus de Poisson $\emptyset \xrightarrow{c_{0,1}} R$. On sait que ce processus n'admet pas de distribution stationnaire.
3. Il arrive que certains états ne soient pas accessibles à partir de l'état initial. C'est notamment le cas pour le système d'ordre $N = 2$:



Si l'état initial n est pair (respectivement impair), seuls les états pairs (respectivement impairs) sont accessibles. Sur cet exemple, on se ramène à une chaîne de Markov *irréductible* en réduisant l'espace d'état aux états accessibles depuis l'état de départ.

3.2 Structure de l'hamiltonien

On pose $H = (1 - z) \sum_{0 \leq \alpha \leq N} h_\alpha \frac{\partial^\alpha}{\partial z^\alpha}$. Un simple calcul, effectué dans le cas particulier $N = 4$, permet de comprendre la structure de l'hamiltonien :

$$\begin{aligned} h_0(z) &= -(c_{0,1} + c_{0,2} + c_{0,3} + c_{0,4}) - (c_{0,2} + c_{0,3} + c_{0,4})z - (c_{0,3} + c_{0,4})z^2 - c_{0,4}z^3 \\ h_1(z) &= c_{1,0} - (c_{1,2} + c_{1,3} + c_{1,4})z - (c_{1,3} + c_{1,4})z^2 - c_{1,4}z^3 \\ h_2(z) &= c_{2,0} + (c_{2,0} + c_{2,1})z - (c_{2,3} + c_{2,4})z^2 - c_{2,4}z^3 \\ h_3(z) &= c_{3,0} + (c_{3,0} + c_{3,1})z + (c_{3,0} + c_{3,1} + c_{3,2})z^2 - c_{3,4}z^3 \\ h_4(z) &= c_{4,0} + (c_{4,0} + c_{4,1})z + (c_{4,0} + c_{4,1} + c_{4,2})z^2 + (c_{4,0} + c_{4,1} + c_{4,2} + c_{4,3})z^3 \end{aligned}$$

Grâce au dictionnaire (5), l'opérateur H est converti en un opérateur aux différences W tel que

$$(W \bullet \pi)_n = \sum_{-N < k \leq N} A_k(n) \pi_{n+k}, \quad (n \in \mathbb{N}).$$

La somme en partie droite contient un ensemble de $2N$ termes. Cette somme se décompose en deux parties comportant chacun N termes, la première pour les indices $-N < k \leq 0$ et l'autre pour $0 < k \leq N$.

Pour $N = 4$, le calcul asymptotique des coefficients $A_k(n)$ lorsque $n \rightarrow \infty$ donne

$$\begin{cases} A_4(n) & \sim (c_{4,0}) n^4 & A_0(n) & \sim -c_{3,4} n^3 \\ A_3(n) & \sim (c_{4,0} + c_{4,1}) n^4 & A_{-1}(n) & \sim -c_{2,4} n^2 \\ A_2(n) & \sim (c_{4,0} + c_{4,1} + c_{4,2}) n^4 & A_{-2}(n) & \sim -c_{1,4} n \\ A_1(n) & \sim (c_{4,0} + c_{4,1} + c_{4,2} + c_{4,3}) n^4 & A_{-3}(n) & \sim -c_{0,4} \end{cases} \quad (8)$$

Proposition 1 *L'hamiltonien défini en (7) est de la forme*

$$H = (1 - z) \sum_{\alpha=0}^N \left(Q_\alpha(z) - P_\alpha(z) \right) \frac{\partial^\alpha}{\partial z^\alpha}$$

où $P_\alpha(z)$ et $Q_\alpha(z)$ sont des polynômes à coefficients positifs donnés par les formules

$$\begin{cases} P_\alpha(z) &= \sum_{k=\alpha}^{N-1} z^k \sum_{\beta=k+1}^N c_{\alpha,\beta} \\ Q_\alpha(z) &= \sum_{k=0}^{\alpha-1} z^k \sum_{\beta=0}^k c_{\alpha,\beta} \end{cases} \quad (9)$$

Proposition 2 *Si le polynôme initial $Q_N \neq 0$, les singularités, à distance finie, de l'équation $H \bullet \phi(z) = 0$ appartiennent au disque unité fermé $|z| \leq 1$. De plus, lorsque les constantes cinétiques $c_{N,n} > 0$ pour $n = 1, \dots, N-1$, les singularités sont toutes situées à l'intérieur du disque unité.*

PREUVE – D'après la proposition 1, l'initial de l'hamiltonien H est de la forme $(1 - z) Q_N(z)$. Les racines du polynôme Q_N sont dans le disque unité : compte-tenu de la structure particulière du polynôme Q_N , la preuve se ramène au théorème de Eneström etakeya 1.

D'après le corollaire 1, les racines de $Q_N(z)$ sont dans le disque $|z| \leq r_2$ où $r_2 \leq 1$ est défini par (10). Pour qu'une racine soit de module 1, il faut que $r_2 = 1$. Compte-tenu de la structure particulière du polynôme Q_N , cette condition $r_2 = 1$ est équivalente à la nullité d'au moins une constante cinétique de l'ensemble $\{c_{N,1}, c_{N,2}, \dots, c_{N,N-1}\}$. \square

Théorème 1 (Eneström etakeya [1]) *Soit un polynôme à coefficients réels de degré $n > 0$*

$$p(z) := \sum_{k=0}^n a_k z^k, \quad (a_n \neq 0),$$

tel que $a_n \geq a_{n-1} \geq a_{n-2} \geq \dots \geq a_1 \geq a_0 \geq 0$. Alors les racines complexes du polynôme $p(z)$ appartiennent toutes au disque unité fermé $|z| \leq 1$.

PREUVE – Le polynôme $(1 - z)p(z)$ se met sous la forme $-a_n z^{n+1} + \varphi(z)$ en posant

$$\varphi(z) := (a_n - a_{n-1}) z^n + (a_{n-1} - a_{n-2}) z^{n-1} + \dots + (a_1 - a_0) z + a_0$$

Dans le disque $|z| \leq 1$, on majore en module le polynôme $z^n \varphi(1/z)$

$$\begin{aligned} |z^n \varphi(1/z)| &\leq |a_n - a_{n-1}| + |a_{n-1} - a_{n-2}| |z| + \dots + |a_0| |z|^n && \text{inégalité triangulaire} \\ &\leq |a_n - a_{n-1}| + |a_{n-1} - a_{n-2}| + \dots + |a_1 - a_0| + |a_0| && \text{car } |z| \leq 1 \\ &\leq (a_n - a_{n-1}) + (a_{n-1} - a_{n-2}) + \dots + (a_1 - a_0) + a_0 && \text{car } a_n \geq a_{n-1} \geq \dots \\ &\leq a_n, \end{aligned}$$

autrement dit, $|\varphi(1/z)| \leq a_n |z|^{-n}$. En remplaçant z par $1/z$, on en déduit $|\varphi(z)| \leq a_n |z|^n$ dans la couronne $|z| \geq 1$.

Pour $|z| > 1$, la quantité $(1-z)p(z) = -a_n z^{n+1} + \varphi(z) > 0$. En effet

$$\begin{aligned} |(1-z)p(z)| &\geq |-a_n z^{n+1}| - |\varphi(z)| && \text{inégalité triangulaire} \\ &\geq a_n |z|^{n+1} - a_n |z|^n && \text{majoration de } |\varphi(z)| \text{ pour } |z| \geq 1 \\ &\geq a_n |z|^n (|z| - 1) && c_{2,0} + (c_{2,0} + c_{2,1}) z \\ &> 0 && \text{car } a_n > 0 \text{ et } |z| > 1. \end{aligned}$$

Donc $p(z) \neq 0$ pour $|z| > 1$ et par suite, ses racines sont toutes dans le disque fermé $|z| \leq 1$.
□

Corollaire 1 *Sous les hypothèses du théorème 1, les racines du polynôme $p(z)$ sont toutes dans la couronne $r_1 \leq |z| \leq r_2$ en posant*

$$r_1 := \min_{k=1,\dots,n} \frac{a_{k-1}}{a_k}, \quad r_2 := \max_{k=1,\dots,n} \frac{a_{k-1}}{a_k}. \quad (10)$$

PREUVE – On applique le théorème 1 pour chacun des polynômes $p_1(z) := z^n p(r_1/z)$ et $p_2(z) := p(r_2 z)$. □

3.3 Solutions entières

Proposition 3 *Lorsque les singularités de l'équation $H \bullet \phi(z)$ sont situées à l'intérieur du disque unité, la série génératrice (ordinaire) $\phi(z)$ associée à une distribution stationnaire est convergente dans tout le plan complexe \mathbb{C} .*

PREUVE – la série génératrice à coefficients réels positifs $\phi(z)$ est absolument convergente en $z = 1$ car $\phi(1) = 1$. Elle vérifie l'équation différentielle linéaire $H \bullet \phi(z) = 0$.

De plus, les singularités de cette équation sont dans le disque unité ouvert $|z| < 1$, donc la série $\phi(z)$ est analytique sur toutes les singularités (à distance finie) de l'équation. Comme l'équation différentielle est *linéaire*, le lieu singulier d'une solution quelconque est inclus dans le lieu singulier de l'équation. La série $\phi(z)$ ayant au plus une singularité en $z = \infty$ est donc convergente dans tout le plan complexe. □

Pour le système $2R \xrightarrow{c_{2,0}} \emptyset$, $c_{2,0} \neq 0$, les deux états $n = 0$ et $n = 1$ sont *absorbants*. L'hamiltonien $H = (1 - z^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ annule les polynômes de la forme $az + 1 - a$, $0 \leq a \leq 1$ qui sont autant de séries stationnaires normalisées. Il peut donc exister plusieurs distributions stationnaires.

4 Les systèmes chimiques d'ordre 1

Le système $\{\emptyset \xrightarrow{c_{0,1}} R, R \xrightarrow{c_{1,0}} \emptyset\}$ modélise la file d'attente $M/M/\infty$. L'hamiltonien vaut $H := c_{1,0}(1 - z) \frac{\partial}{\partial z} + c_{0,1}(z - 1)$. On pose $\rho := \frac{c_{0,1}}{c_{1,0}}$ lorsque $c_{1,0} > 0$.

4.1 Distribution stationnaire

(i) Si $c_{1,0} > 0$, l'équation $H\bullet\phi(z) = 0$ s'écrit

$$c_{1,0}(1-z)\phi'(z) + c_{0,1}(z-1)\phi(z) = 0,$$

i.e. $\phi'(z) = \rho\phi(z)$. Compte-tenu de la condition $\phi(1) = 1$, la série génératrice stationnaire normalisée vaut

$$\phi(z) = e^{\rho(z-1)}.$$

(ii) Si $c_{1,0} = 0$, l'équation $H\bullet\phi(z) = 0$ s'écrit $c_{0,1}(z-1)\phi(z) = 0$, ce qui entraîne $\phi(z) = 0$. Il n'y a donc pas de distribution stationnaire.

4.2 Résolution directe de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger $\frac{\partial}{\partial t}\phi(z, t) = H\bullet\phi(z, t)$ se résoud par la méthode des caractéristiques ou la méthode de Magnus. Le résultat, valable en partant de l'état initial n_0 , est classique

$$\phi(z, t) = \exp(\rho q(t)(z-1)) \left[q(t) + z p(t) \right]^{n_0},$$

avec $p(t) := \exp(-c_{1,0}t)$ et $q(t) := 1 - \exp(-c_{1,0}t)$.

La formule montre que la variable (aléatoire) d'état $X(t)$ se décompose en 2 variables indépendantes entre elles : $X(t) = P(t) + B(t)$. L'une est distribuée selon la loi binomiale et l'autre selon la loi de Poisson :

$$B(t) \sim \mathcal{B}(n_0, p(t)), \quad P(t) \sim \mathcal{P}(\rho q(t)).$$

Lorsque $c_{1,0} > 0$, on a $\lim_{t \rightarrow \infty} p(t) = 0$ et par suite $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi(z, t) = \exp(\rho(z-1))$. La chaîne de Markov est donc ergodique car la limite de la distribution transitoire est égale à la distribution stationnaire, laquelle obéit à la loi de Poisson de paramètre ρ .

5 Les systèmes chimiques d'ordre 2

D'après la proposition 1, l'hamiltonien H est de la forme

$$H := (1-z) \sum_{\alpha=0}^2 h_{\alpha}(z) \frac{\partial^{\alpha}}{\partial z^{\alpha}} \text{ avec } \begin{cases} h_0(z) &= -(c_{0,1} + c_{0,2}) - c_{0,2}z \\ h_1(z) &= c_{1,0} - c_{1,2}z \\ h_2(z) &= c_{2,0} + (c_{2,0} + c_{2,1})z \end{cases} \quad (11)$$

5.1 Modèles de base

On montrera qu'en général, l'équation donnant la distribution stationnaire

$$[c_{2,0} + (c_{2,0} + c_{2,1})z] \phi''(z) + [c_{1,0} - c_{1,2}z] \phi'(z) - [(c_{0,1} + c_{0,2}) + c_{0,2}z] \phi(z) = 0 \quad (12)$$

se ramène à l'équation de Kummer (35) ou à l'équation biconfluente (36).

5.1.1 Modèle associé à l'équation de Kummer

D'après (11), l'hamiltonien du système de réactions chimiques



est $H = (1 - z) \left(z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + (\gamma - z) \frac{\partial}{\partial z} - \alpha \right)$.

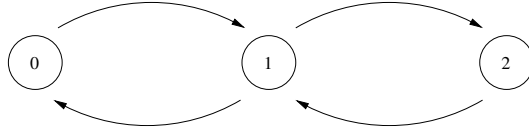


FIGURE 1 – Système associé à l'équation de Kummer.

Lemme 1 *L'équation stationnaire $H \bullet \phi(z) = 0$ du système (13) est exactement l'équation de Kummer (35). Elle admet la solution entière (unique à un facteur non nul près)*

$$\phi(z) = \begin{cases} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} \alpha \\ \gamma \end{matrix} \middle| z \right) & \text{si } \gamma > 0 \\ z {}_1F_1 \left(\begin{matrix} 1 + \alpha \\ 2 \end{matrix} \middle| z \right) & \text{sinon} \end{cases}$$

5.1.2 Modèle associé à l'équation biconfluente

D'après (11), l'hamiltonien du système de réactions chimiques



est $H = (1 - z) \left(z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \gamma \frac{\partial}{\partial z} - 1 \right)$.

Lemme 2 *L'équation stationnaire (12) du système (14) est exactement l'équation biconfluente (36). Elle admet la solution entière (unique à un facteur non nul près)*

$$\phi(z) = \begin{cases} {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ \gamma \end{matrix} \middle| z \right) & \text{si } \gamma > 0 \\ z {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ 2 \end{matrix} \middle| z \right) & \text{sinon} \end{cases}$$

5.2 Calcul de la série génératrice des probabilités

Lorsque $c_{2,0} + c_{2,1} \neq 0$, l'équation (12) a une seule singularité à distance finie

$$z_0 := -\frac{c_{2,0}}{c_{2,0} + c_{2,1}} \quad (15)$$

Elle est régulière avec pour équation indicelle associée $\rho(\rho - 1 + \rho_0) = 0$ avec

$$\rho_0 = \frac{c_{1,2}c_{2,0} + c_{1,0}c_{2,0} + c_{1,0}c_{2,1}}{(c_{2,0} + c_{2,1})^2} \quad (16)$$

La deuxième singularité en $z = \infty$ est irrégulière.

L'équation (12) se ramène en posant $z = x + z_0$ et $\phi(z) = f(x)$ à l'équation (37) pour les paramètres

$$\begin{cases} a_0 = -\frac{c_{0,2}}{c_{2,0} + c_{2,1}} & a_1 = -\frac{c_{1,2}}{c_{2,0} + c_{2,1}} \\ b_0 = -\frac{c_{0,1}c_{2,0} + c_{0,1}c_{2,1} + c_{0,2}c_{2,1}}{(c_{2,0} + c_{2,1})^2} & b_1 = \frac{c_{1,2}c_{2,0} + c_{1,0}c_{2,0} + c_{1,0}c_{2,1}}{(c_{2,0} + c_{2,1})^2} \end{cases} \quad (17)$$

Lemme 3 *Génériquement, l'équation (12) admet la solution entière (unique à un facteur nul nul près)*

$$\phi(z) = e^{-mz} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} \alpha \\ \gamma \end{matrix} \middle| k(z - z_0) \right), \quad (18)$$

$$\text{pour } k := \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_0}, \quad m := \frac{1}{2}(a_1 + k), \quad \alpha := \frac{1}{2}b_1 + \frac{1}{2k}(a_1b_1 - 2b_0), \quad \gamma = b_1.$$

PREUVE – Utiliser la classification des équations de la forme (37) exposée dans le lemme 5. \square

Spécialisation dans quelques particuliers On utilise essentiellement les résultats de classification du lemme 5.

(i) Si $\boxed{c_{2,1} = 0, c_{1,2} = 0, c_{1,0} = 0, c_{0,2} = 0}$ (voir figure 2)

Le calcul donne $z_0 = -1, a_0 = 0, a_1 = 0, b_0 = -\frac{c_{0,1}}{c_{2,0}}, b_1 = 0$. Comme $a_1^2 - 4a_0 = 0$, on se ramène à l'équation biconfluente. On trouve $\gamma = 0, m = 0, k = -b_0$. On obtient finalement la série génératrice non normalisée

$$\phi(z) = (z + 1) {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ 2 \end{matrix} \middle| k(z + 1) \right). \quad (19)$$

(ii) Si $\boxed{c_{1,2} = 0, c_{1,0} = 0, c_{0,2} = 0}$ (voir figure 3)

Le calcul donne $a_0 = 0, a_1 = 0, b_0 = -\frac{c_{0,1}}{c_{2,0} + c_{2,1}}, b_1 = 0$. Comme $a_1^2 - 4a_0 = 0$, on se ramène à l'équation biconfluente. On trouve $\gamma = 0, m = 0, k = -b_0$. On obtient la série génératrice non normalisée

$$\phi(z) = (z - z_0) {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ 2 \end{matrix} \middle| k(z - z_0) \right). \quad (20)$$

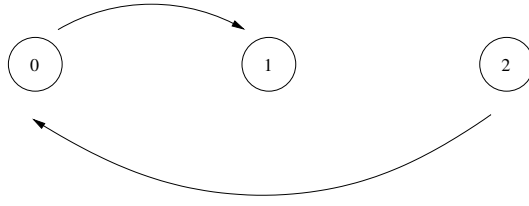
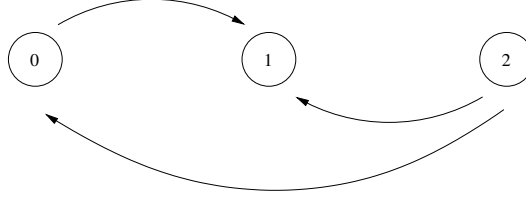


FIGURE 2 – Spécialisation (i).



la série génératrice

FIGURE 3 – Spécialisation (ii).

(iii) Si $\boxed{c_{1,2} = 0, c_{0,2} = 0}$ (voir figure 4)

Le calcul donne $a_0 = 0, a_1 = 0, b_0 = -\frac{c_{0,1}}{c_{2,0} + c_{2,1}}, b_1 = \frac{c_{1,0}}{c_{2,0} + c_{2,1}}$. Comme $a_1^2 - 4a_0 = 0$, on se ramène à l'équation biconfluente. On a $\gamma = b_1, m = 0, k = -b_0$. On obtient la série génératrice non normalisée

$$\phi(z) = {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ \gamma \end{matrix} \middle| k(z - z_0) \right). \quad (21)$$

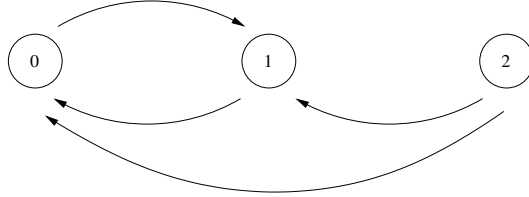


FIGURE 4 – Spécialisation (iii).

(iv) Si $\boxed{c_{0,2} = 0}$ (voir figure 5)

Le calcul donne $a_0 = 0, a_1 = -\frac{c_{1,2}}{c_{2,0} + c_{2,1}}, b_0 = -\frac{c_{0,1}}{c_{2,0} + c_{2,1}}, b_1 = \rho_0$.

Comme $a_1^2 - 4a_0 \neq 0$, on se ramène à l'équation de Kummer. On a $\alpha = \frac{c_{0,1}}{c_{1,2}}, \gamma = b_1, m = 0, k = -a_1$. On obtient la série génératrice non normalisée

$$\phi(z) = {}_1F_1 \left(\begin{matrix} \alpha \\ \gamma \end{matrix} \middle| k(z - z_0) \right). \quad (22)$$

(v) Si $\boxed{c_{2,1} = 0, c_{1,2} = 0, c_{1,0} = 0}$ (voir figure 6)

Le calcul donne $z_0 = -1, a_0 = -\frac{c_{0,2}}{c_{2,0}}, a_1 = 0, b_0 = -\frac{c_{0,1}}{c_{2,0}}, b_1 = 0$.

Comme $a_1^2 - 4a_0 \neq 0$, on se ramène à l'équation de Kummer.

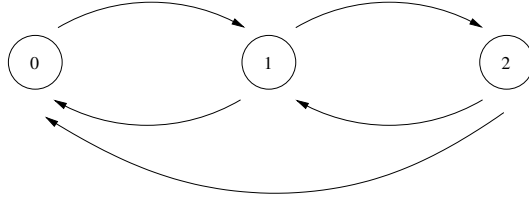


FIGURE 5 – Spécialisation (iv).

On a $m := \sqrt{\frac{c_{0,2}}{c_{2,0}}}$, $k := 2m$, $\alpha = -\frac{1}{2}b_0m$, $\gamma = 0$. On obtient la série génératrice non normalisée

$$\phi(z) = e^{-mz} (z+1) {}_1F_1 \left(\begin{matrix} 1+\alpha \\ 2 \end{matrix} \middle| k(z+1) \right). \quad (23)$$

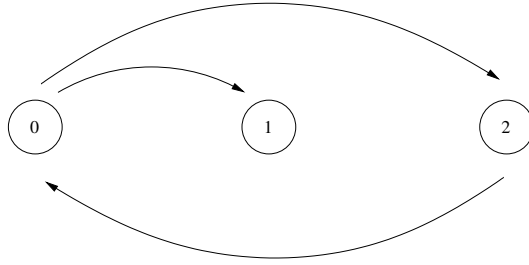


FIGURE 6 – Spécialisation (v).

6 Applications numériques

6.1 Hamiltonien du 2eme ordre

6.1.1 Distribution stationnaire

A titre d'exemple, considérons le cas (23) pour $c_{0,1} = c_{0,2} = c_{2,0} = 1$. La série génératrice normalisée est alors

$$\phi(z) = \frac{1}{K} e^{-z} (z+1) {}_1F_1 \left(\begin{matrix} \frac{3}{2} \\ 2 \end{matrix} \middle| 2(z+1) \right) \quad (24)$$

pour la constante

$$K := 2e^{-1} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} \frac{3}{2} \\ 2 \end{matrix} \middle| 4 \right) \quad (25)$$

obtenue en imposant $\phi(1) = 1$. L'équation stationnaire $H \bullet \phi(z) = 0$ se spécialise en

$$(z+1) \phi''(z) - (z+2) \phi(z) = 0 \quad (26)$$

dont la solution en série

$$\phi(z) = p + qz + pz^2 + \left(\frac{1}{3}q - \frac{1}{6}p \right) z^3 + \left(\frac{1}{4}p - \frac{1}{12}q \right) z^4 + \left(\frac{1}{12}q - \frac{7}{60}p \right) z^5 + \dots \quad (27)$$

dépend des deux constantes $p := \phi(0)$ et $q := \phi'(0)$. Ces constantes sont obtenues à partir de la formule explicite (24), ce qui donne

$$p = \frac{e}{2} \frac{{}_1F_1\left(\frac{3}{2} \middle| 2\right)}{{}_1F_1\left(\frac{3}{2} \middle| 4\right)} \simeq 0.2365787942, \quad q = \frac{3e}{4} \frac{{}_1F_1\left(\frac{5}{2} \middle| 2\right)}{{}_1F_1\left(\frac{3}{2} \middle| 4\right)} \simeq 0.4001438075. \quad (28)$$

Le dictionnaire (5) transforme l'équation différentielle (26) en la récurrence linéaire

$$-\pi_{n-1} - 2\pi_n + n(n+1)\pi_{n+1} + (n+1)(n+2)\pi_{n+2} = 0, \quad (29)$$

avec les conditions initiales $\pi_{-1} = 0$, $\pi_0 = p$, $\pi_1 = q$. Cette récurrence linéaire, correctement initialisée, fournit une méthode très efficace pour calculer *numériquement* la distribution stationnaire. Celle-ci est représentée par l'histogramme de la figure 7.

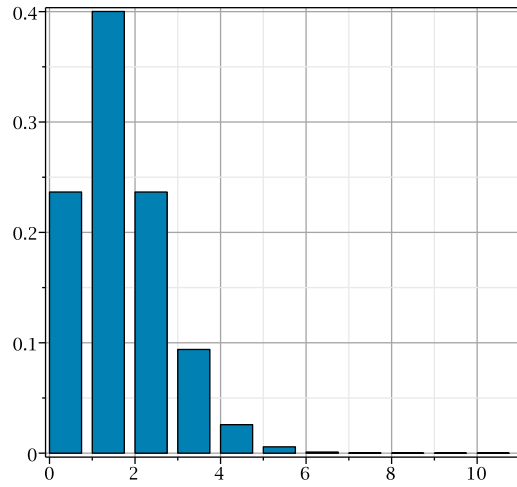


FIGURE 7 – Distribution stationnaire.

6.1.2 Calcul des moments factoriels

Pour tout entier naturel k , le k -ième moment factoriel (en régime stationnaire)

$$\mu_k := E(X^k) := \sum_{n \geq k} n(n-1) \dots (n-k+1) \pi_n$$

s'obtient à partir de la série génératrice $\phi(z)$ par la formule $E(X^k) = \frac{d^k}{dz^k} \phi(z)|_{z=1}$. Pour le moment d'ordre 1, d'après (24) cette formule donne $m := E(X) = \phi'(1)$ avec

$$m = -\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \frac{{}_1F_1\left(\frac{5}{2} \middle| 4\right)}{{}_1F_1\left(\frac{3}{2} \middle| 4\right)} \simeq 1.294503160. \quad (30)$$

Pour les moments d'ordre supérieur, il est commode de développer la série génératrice en puissances entières de $z - 1$, sous la forme

$$\phi(z) = \sum_{k \geq 0} u_k (z - 1)^k,$$

ce qui permet de calculer le moment factoriel par la formule $\mu_k = k! u_k$. On a donc démontré l'identité

$$\phi(z) = \sum_{n \geq 0} \pi_n z^n = \sum_{k \geq 0} \mu_k \frac{(z - 1)^k}{k!}. \quad (31)$$

La suite est une mise en oeuvre de la transformée de Laplace formelle pour obtenir une récurrence linéaire sur la suite des moments factoriels μ_k , $k \in \mathbb{N}$. Le changement de variable $z = 1 + x$, $\phi(z) = M(x)$ appliqué à la série génératrice (24) donne

$$M(x) = \frac{1}{2} (x + 2) e^{-x} \frac{{}_1F_1\left(\frac{3}{2} \middle| 2(x + 2)\right)}{{}_1F_1\left(\frac{3}{2} \middle| 4\right)} = \sum_{k \geq 0} u_k x^k.$$

Le même changement de variable, appliqué à l'équation différentielle (26), donne

$$(x + 2) M''(x) - (x + 3) M(x) = 0,$$

ce qui permet d'obtenir le développement en série entière

$$M(x) = 1 + mx + \frac{3}{4}x^2 + \left(\frac{m}{4} - \frac{1}{24}\right)x^3 + \left(\frac{5}{48} - \frac{m}{48}\right)x^4 + \left(\frac{m}{40} - \frac{1}{64}\right)x^5 + \dots$$

dépendant du seul moment m , défini en (30) ainsi que la récurrence

$$-u_{k-1} - 3u_k + k(k+1)u_{k+1} + 2(k+1)(k+2)u_{k+2} = 0,$$

qu'il convient d'initialiser en posant $u_{-1} = 0$, $u_0 = 1$, $u_1 = m$.

La suite des moments factoriels μ_k , $k \in \mathbb{N}$ vérifie alors la récurrence linéaire

$$-k\mu_{k-1} - 3\mu_k + k\mu_{k+1} + 2\mu_{k+2} = 0,$$

initialisée en posant $\mu_{-1} = 0$, $\mu_0 = 1$, $\mu_1 = m$. Cette récurrence permet de calculer numériquement la suite des moments factoriels :

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...
μ_k	1	1.29450	3/2	1.69175	1.85274	2.00850	2.14561	2.28060	2.40214	...
$\frac{\mu_k}{k!}$	1	1.97638	7/4	.944556	.356626	.102059	.023329	.004418	.000712	...

6.2 Hamiltonien du 4eme ordre

On considère le système de réactions chimiques



pour des constantes cinétiques $c_{0,1} = c_{1,2} = c_{4,3} = c_{4,0} = 1$. L'équation $H \bullet \phi(z) = 0$ s'écrit

$$(2z^3 + z^2 + z + 1) \frac{d^4}{dz^4} \phi(z) - z \frac{d}{dz} \phi(z) - \phi(z) = 0 \quad (33)$$

On vérifie que les racines du polynôme initial $2z^3 + z^2 + z + 1$ sont à l'intérieur du disque unité.

On calcule, à l'aide d'un système de calcul symbolique, un développement limité (à coefficients dans \mathbb{Q}) de la série $\phi(z) := \sum_{n \geq 0} \pi_n z^n$ pour la condition initiale $\pi_0 = 1$ et trois coefficients indéterminés ($\pi_1 := a_1, \pi_2 := a_2, \pi_3 := a_3$). Pour cela, on utilise la récurrence construite à partir de l'équation (33)

$$\begin{aligned} & -\pi_n + 2n(n-1)(n-2)\pi_{n+1} + n(n+2)(n-1)\pi_{n+2} + n(n+3)(n+2)\pi_{n+3} \\ & + (n+4)(n+3)(n+2)\pi_{n+4} = 0 \quad (n \geq 0). \end{aligned} \quad (34)$$

L'équation $H \bullet \phi(z) = 0$ étant linéaire, les coefficients π_n sont des combinaisons linéaires (à coefficients dans \mathbb{Q}) des trois coefficients indéterminés (a_1, a_2, a_3) . On pose que trois coefficients successifs $(\pi_{M-2}, \pi_{M-1}, \pi_M)$ sont nuls pour un entier M suffisamment grand. Cette approximation est justifiée par le fait que la série $\phi(z)$ a un rayon de convergence infini, donc la suite π_n converge vers 0, contrairement aux solutions à rejeter. Le système linéaire ainsi obtenu permet de calculer les trois coefficients indéterminés, ce qui donne pour $M = 12$,

$$a_1 = \frac{4577777252}{8301537939}, \quad a_2 = \frac{9176801389}{24904613817}, \quad a_3 = \frac{139828363229}{265649214048}.$$

Les coefficients π_n pour $n = 1, \dots, M$, calculés plus haut sont réévalués en virgule flottante en tenant compte des valeurs numériques de (a_1, a_2, a_3) . La constante $K := \pi_0 + \pi_1 + \dots + \pi_M$ permet de normaliser la série $\phi(z)$ pour que $\phi(1) = 1$, ce qui donne la distribution stationnaire (tronquée à l'ordre $M - 2$) suivante :

k	0	1	2	3	4	5	...	9	10	11	12
π_k	0.40179	0.22156	0.14805	0.21149	0.01674	0.00034	...	$4.2 \cdot 10^{-14}$	0	0	0

représentée par l'histogramme de la figure 8.

Il est à noter qu'un calcul *backward* avec la même récurrence (34) est un peu plus simple. Il suffit d'un *seul* coefficient indéterminé $a := \pi_{M-3}$ en conservant la contrainte $(\pi_{M-2}, \pi_{M-1}, \pi_M) = (0, 0, 0)$ pour obtenir les quatre premiers coefficients (π_0, \dots, π_3) puis normaliser $\phi(z)$. Cette variante, qui fonctionne parce qu'il manque les termes $(\pi_{n-3}, \pi_{n-2}, \pi_{n-1})$ dans la récurrence (34), ne change pas le résultat final obtenu pour la série stationnaire $\phi(z)$.

Remerciements : Cet article a bénéficié d'un exposé très inspiré de A. Duval sur la méthode de Frobenius appliquée aux équations différentielles linéaires et de discussions intéressantes avec F. Lemaire.

Contributions respectives : La partie de cet article concernant l'étude des singularités de l'équation $H \bullet \phi(z) = 0$ est entièrement due à M. Petitot. Les deux autres auteurs, à partir de leur expérience dans le projet

ANR ICEBERG, 2012-17

ont participé à la mise au point du calcul numérique de la distribution stationnaire.

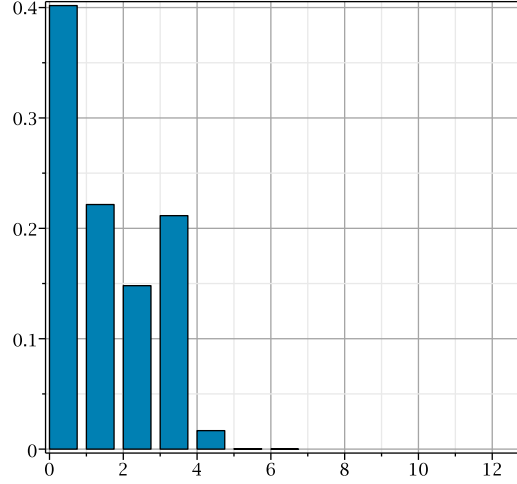


FIGURE 8 – Distribution stationnaire du système (32)

A Rappels sur l'équation de Kummer

A.1 Généralités

L'équation de Kummer est une équation hypergéométrique dépendant de deux paramètres complexes (α, γ) de la forme

$$z y''(z) + (\gamma - z) y'(z) - \alpha y(z) = 0. \quad (35)$$

C'est une équation de type hypergéométrique $L \bullet y(z) = 0$ associée à l'opérateur différentiel linéaire

$$L := \theta(\theta - 1 + \gamma) - z(\theta + \alpha) \text{ avec } \theta := z \frac{d}{dz}$$

Elle admet une singularité régulière en $z = 0$ et une singularité irrégulière en $z = \infty$. L'équation indicielle en $z = 0$ est $\rho(\rho - 1 + \gamma) = 0$. Au point $z = \infty$, l'équation indicielle est de degré un, à savoir $\rho - \alpha = 0$.

La transformation $y(z) = z^{1-\gamma} \tilde{y}(z)$ est une symétrie : si $y(z)$ est une solution de l'équation de Kummer (35), alors $\tilde{y}(z)$ est une solution de cette même équation pour les paramètres $\tilde{\alpha} := 1 + \alpha - \gamma$ et $\tilde{\gamma} := 2 - \gamma$. On vérifie que cette symétrie est une involution.

A.2 Solutions entières

- (i) Lorsque $\gamma \notin \{0, -1, -2, \dots\}$, une première solution entière dans \mathbb{C} est la fonction hypergéométrique

$$f_1(z) := {}_1F_1 \left(\begin{matrix} \alpha \\ \gamma \end{matrix} \middle| z \right) = \sum_{n \geq 0} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \cdot \frac{z^n}{n!}.$$

Génériquement $\gamma \notin \mathbb{Z}$, la symétrie fournit une deuxième solution

$$f_2(z) := z^{1-\gamma} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} 1 + \alpha - \gamma \\ 2 - \gamma \end{matrix} \middle| z \right)$$

\mathbb{C} -linéairement indépendante de $f_1(z)$. Dans le cas résonnant $\gamma \in \{1, 2, \dots\}$, la deuxième solution est donnée par la méthode de Frobénius sous la forme

$$f_2(z) := f_1(z) \ln(z) + h(z),$$

où $h(z)$ est une série entière. Dans les deux cas, la deuxième solution $f_2(z)$ n'est pas analytique en $z = 0$.

- (ii) Lorsque $\gamma \in \{0, -1, -2, \dots\}$, on se ramène au cas précédent par la transformation

$$(z, y, \alpha, \gamma) \mapsto (z, z^{1-\gamma}y, 1 + \alpha - \gamma, 2 - \gamma)$$

La solution entière cherchée est alors

$$f_1(z) := z^{1-\gamma} {}_1F_1 \left(\begin{matrix} 1 + \alpha - \gamma \\ 2 - \gamma \end{matrix} \middle| z \right).$$

Nous avons donc montré que

Lemme 4 *Les solutions entières de l'équation de Kummer (35) forment un \mathbb{C} -espace vectoriel de dimension 1.*

A.3 Equation hypergéométrique biconfluente

Soit l'équation différentielle dépendant d'un paramètre complexe γ de la forme

$$z y''(z) + \gamma y'(z) - y(z) = 0. \quad (36)$$

C'est une équation de type hypergéométrique $L \bullet y(z) = 0$ associée à l'opérateur différentiel linéaire

$$L := \theta(\theta - 1 + \gamma) - z$$

Elle admet une singularité régulière en $z = 0$ et une singularité irrégulière en $z = \infty$. L'équation indicielle en $z = 0$ est $\rho(\rho - 1 + \gamma) = 0$. Au point $z = \infty$, l'équation indicielle est de degré 0.

La transformation $y(z) = z^{1-\gamma} \tilde{y}(z)$ est une symétrie : si $y(z)$ est une solution de l'équation (36), alors $\tilde{y}(z)$ est une solution de cette même équation pour le paramètre $\tilde{\gamma} := 2 - \gamma$. On vérifie que cette symétrie est une involution.

Comme pour l'équation de Kummer, il y a une seule solution entière définie à un facteur non nul près

$$f(z) := \begin{cases} {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ \gamma \end{matrix} \middle| z \right) & \text{si } \gamma \notin \{0, -1, -2, \dots\} \\ z^{1-\gamma} {}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ 2 - \gamma \end{matrix} \middle| z \right) & \text{sinon} \end{cases}$$

La deuxième solution (non entière) est donnée par la méthode de Frobénius comme pour l'équation de Kummer.

REMARQUE – L'équation biconfluente se ramène à l'équation de Kummer (35) par la formule (non utilisée dans cet article)

$${}_0F_1 \left(\begin{matrix} - \\ \gamma \end{matrix} \middle| z \right) = \exp(-2\sqrt{z}) {}_1F_1 \left(\begin{matrix} -\frac{1}{2} + \gamma \\ -1 + 2\gamma \end{matrix} \middle| 4\sqrt{z} \right).$$

□

A.4 L'équation du 2eme ordre à coefficients polynomiaux de degré 1

Soit z_0 la racine du polynôme initial (supposé non constant). La translation sur la variable indépendante $z = x + z_0$ ramène la singularité en $x = 0$ et l'équation à résoudre est de la forme

$$x f''(x) + (a_1 x + b_1) f'(x) + (a_0 x + b_0) f(x) = 0 \quad (37)$$

dépendant de quatre paramètres complexes (a_i, b_i) pour $0 \leq i \leq 1$. Cette famille d'équations est stable sous l'action du groupe de transformations

$$(x, f) \mapsto (kx, \exp(mx) f) \quad (38)$$

dépendant de deux paramètres complexes $(k \neq 0, m)$. Cette action définit une représentation $G \longrightarrow \text{Diff } J^0$ du groupe $G := \{(k, m) \in \mathbb{C}^2 \mid k \neq 0\}$ muni de la loi de composition $(k_1, m_1)(k_2, m_2) = (k_1 k_2, m_1 k_2 + m_2)$ dans le groupe de difféomorphismes de l'espace des jets d'ordre 0 des fonctions complexes $x \mapsto f(x)$.

On vérifie que l'action (à droite) du groupe G sur les équations de la forme (37) s'écrit en coordonnées

$$(a_0, a_1, b_0, b_1) \mapsto (a_0, a_1, b_0, b_1) \begin{pmatrix} k^2 & 0 & 0 & 0 \\ mk & k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k & 1 \end{pmatrix} + (m^2, 2m, 0, 0).$$

Cette action fait apparaître un invariant et deux semi-invariants

$$I := b_1, \quad J_1 := a_1 b_1 - 2b_0, \quad J_2 := a_1^2 - 4a_0. \quad (39)$$

Plus précisément pour un élément du groupe G , noté $g = (k, m)$, on a $g^* I = I$, $g^* J_1 = k J_1$ et $g^* J_2 = k^2 J_2$.

A.4.1 Calcul des groupes de symétries

Par définition, le groupe de symétries (i.e. groupe d'isotropie) d'une équation de la forme (37) est l'ensemble des éléments $g \in G$ laissant invariante cette équation. Un calcul en coordonnées locales montre qu'il y a trois types de groupes de symétries, comptés à conjugaison près.

- (i) Si $J_1 = J_2 = 0$, le groupe de symétries est un groupe (de Lie) de dimension 1 :

$$H := \{(k, m) \mid k \neq 0, k + 2m = a_1\}$$

- (ii) Si $J_1 = 0, J_2 \neq 0$, le groupe de symétries est un groupe à deux éléments

$$H := \{(1, 0), (-1, a_1)\}$$

- (iii) Si $J_1 \neq 0, J_2 \neq 0$, le groupe de symétries est réduit à l'élément neutre $(1, 0)$.

A.4.2 Classification

Le lemme suivant montre que l'équation différentielle (37) se ramène sous l'action du groupe G à l'une des équations hypergéométriques (36) ou (35).

Lemme 5

- (i) Si $\boxed{J_2 = 0}$, l'équation (37) se résoud sous la forme $f(x) = \exp(-mx) F(kx)$ où la fonction $F(z)$ est solution de l'équation (36) en posant

$$k := \frac{1}{2}J_1, \quad m := \frac{1}{2}a_1, \quad \gamma := b_1.$$

- (ii) Si $\boxed{J_2 \neq 0}$, l'équation (37) se résoud sous la forme $f(x) = \exp(-mx) F(kx)$ où la fonction $F(z)$ est solution de l'équation (35) en posant

$$k := \pm\sqrt{J_2}, \quad m := \frac{1}{2}a_1 + \frac{1}{2}k, \quad \alpha := \frac{1}{2}b_1 + \frac{1}{2k}J_1, \quad \gamma := b_1.$$

Dans le cas $\boxed{a_0 = 0}$, on évite le facteur exponentiel $\exp(-mx)$ en choisissant $k := -a_1$, $m := 0$, ce qui donne $f(x) = F(kx)$ où la fonction $F(z)$ est solution de (35) en posant $\alpha := \frac{b_0}{a_1}$, $\gamma := b_1$.

PREUVE – Remerciements Dans le premier cas, la transformation $z = kx$, $y(z) = \exp(mx) f(x)$ appliquée à l'équation biconfluente (36) donne l'équation (37) définie par les paramètres $a_0 = m^2$, $b_0 = m\gamma - k$, $a_1 = 2m$, $b_1 = \gamma$. On conclut en inversant ce système de relations.

Dans le deuxième cas, la même transformation appliquée à l'équation de Kummer (35) donne l'équation (37) définie par les paramètres

$$\begin{aligned} a_0 &= m^2 - mk & a_1 &= 2m - k \\ b_0 &= m\gamma - \alpha k & b_1 &= \gamma \end{aligned}$$

On conclut en inversant ce système de relations. □

Références

- [1] P. Borwein and T. Erdélyi. *Polynomials and polynomial inequalities*. Graduate Texts in Mathematics. New York, NY : Springer-Verlag, 1995.
- [2] Saber N. Elaydi. *An introduction to difference equations. 2nd ed.* Undergraduate Texts in Mathematics. New York, NY : Springer. xviii, 1999.
- [3] Michael A. Gibson and Joshua Bruck. Efficient exact stochastic simulation of chemical systems with many species and many channels. *J. Phys. Chem.*, 104 :1876–1889, 2000.
- [4] S Vidal, Petitot, F Boulier, F Lemaire, and C Kuttler. Models of stochastic gene expression and Weyl algebra. *Algebraic Biology, LNCS*, June 2010.